

**ГЛОБАЛЬНАЯ МИНИМИЗАЦИЯ МНОГОМЕРНЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ
С ПОМОЩЬЮ УРАВНЕНИЯ КОНВЕКТИВНОЙ ДИФфуЗИИ**

В. В. Федоров

*Тольяттинский государственный университет
vvfmail@mail.ru*

О современных подходах к построению методов минимизации описано в работе [1]. Представляются интересные методы, основанные на решении дифференциальных уравнений.

Как известно, метод градиентов для многомерной минимизации, который можно интерпретировать как решение задачи Коши в конечных разностях, непригоден для глобальной минимизации. Применение метода DEM [2], [3] для функций с локальными минимумами затрудняется вычислением вторых производных целевого функционала, а применение методов, основанных на решении ОДУ второго порядка [4], например, метода тяжелого шарика – решением дополнительной оптимизационной задачи по выбору вспомогательных параметров: масса, начальная скорость и т.д.

В предлагаемом методе многомерная минимизация сводится к одномерной в результате решения нестационарной краевой задачи конвективной диффузии. В методе имитируется диффузионный перенос вещества с концентрацией в многокомпонентном потоке, движущемся в гравитационном поле по неровной поверхности (см. рис. 1). Распределение концентраций i -го вещества в движущемся потоке описывается уравнением конвективной диффузии:

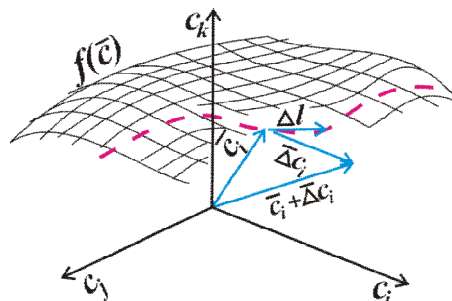


Рисунок 1. Физическая интерпретация метода

Так как величины с одной стороны являются концентрациями i -го вещества в потоке, а с другой – координатами многомерного пространства, то векторы и должны иметь вид:

Скорости же потоков зависят от направления и степени уклона поверхности:

$$\underline{\hspace{1.5cm}}$$

Подставив выражения векторов в уравнение конвективной диффузии, получим дифференциальные уравнения для сведения многомерной минимизации к минимизации в одномерном пространстве:

$$\underline{\hspace{1.5cm}}$$

На точность расчета влияет параметр D . Для наглядности на рисунках 2, 3 представлены результаты минимизации функции с двумя локальными экстремумами

$$f(x, y) = 3e^{-(x+1)^2 - (y+1)^2} - 3e^{-(x+1)^2 - (y-3)^2}$$

с глобальным минимумом -3 в точке $(-1; 3)$ в графическом виде.

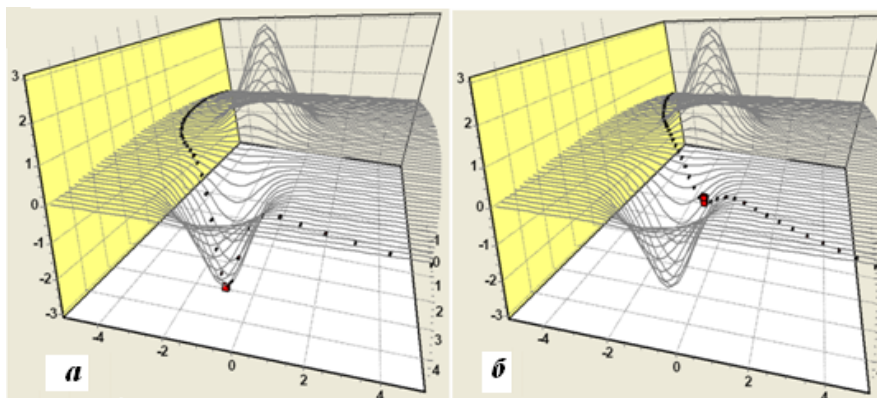


Рисунок 2. Рассчитанная траектория движения конвективно-диффузионного потока по поверхности: а – при $D=0,1$ и б – при $D=0,5$

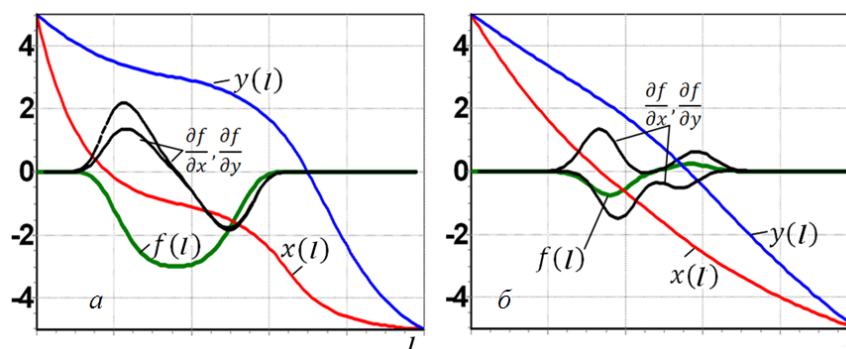


Рисунок 3. Распределение значений искомых переменных, функции и ее производных вдоль траектории l : а – при $D=0,1$ и б – при $D=0,5$

Примеры минимизации с помощью данного метода приведены в работах [5], [6].

ЛИТЕРАТУРА

1. Орлянская И.В. Современные подходы к построению методов глобальной оптимизации. [http://zhurnal.apc.relarn.ru/articles/2002/189.pdf] б.м. : Электронный журнал «ИССЛЕДОВАНО В РОССИИ», 2002 г.
2. Lucjan Piela, Jaroslaw Kostrowicki, and Harold A. Scheraga. The multiple-minima problem in the conformational analysis of molecules. Deformation of the potential energy hypersurface by the diffusion equation method. *Journal of Physical Chemistry*. 1989 г., 93:3339–3346.
3. Hartman-Baker, Rebecca Jean. The Diffusion Equation Method for Global Optimization and Its Application to Magnetotelluric Geoprospecting. *IDEALS*. [В Интернете] 2005 г. http://hdl.handle.net/2142/11055.
4. SNYMAN A.J. New and Dynamic Method for Unconstrained Optimization. *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 6, pp. 449-462. 1982 г.
5. Федоров В.В. Метод конвективно-диффузионной глобальной минимизации для многопараметрической идентификации математических моделей. *Вектор науки ТГУ*. Тольятти, 2012 г., 3(21), с.46-48.
6. Федоров В.В. Новый конвективно-диффузионный метод глобальной минимизации для решения обратных задач химической кинетики. *Заочные электронные конференции*. [В Интернете] www.econf.rae.ru/pdf/2013/03/2260.pdf.